Chapitre 14- Activité numérique -
Acide faible dans l'eau

L'outil numérique, et notamment le langage de programmation Python, permet en chimie d'effectuer des calculs et des tracés à partir de la théorie (constante d'acidité, taux d'avancement final, etc.).

On se propose ici d'utiliser le langage de programmation Python pour calculer le taux d'avancement final de la réaction entre un acide et l'eau et pour tracer un diagramme de distribution.

I. Documents mis à disposition :

Document 1 : Calcul du taux d'avancement final

```
pKa=float(input("pKa du couple : "))
concentration=float(input("Concentration en
mol/L : "))
Ka=10**(-pKa)
### A MODIFIER ###
### Coefficients du polynome du deuxieme degre
a=...
b=...
c=...
### Discriminant
Delta=...
### Solution pour [H3O+]
h=...
### Taux d'avancement final
tau=...
### pH final
pH=-log10(h)
```

Document 2 : Tracé du diagramme de distribution

```
for i in range(120):
        pH.append(1+i/10)
        Pa.append(100/(1+10**(pH[i]-pKa)))
        Pb.append(100-Pa[i])
```

Pour ajouter à la fin de la liste L un élément x, on peut utiliser L.append(x)

Document 3 : Un couple acide base

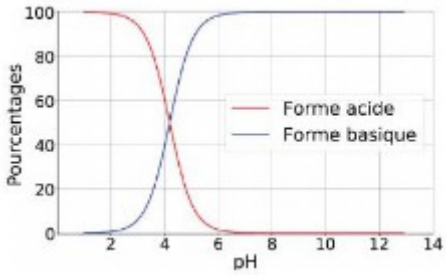
Pour le couple acide benzoique/ion benzoate, $pK_A = 4{,}19$.

Si $c_a = 2{,}50 \times 10^{-3}\,mol.L^{-1}$ alors :

-le taux d'avancement final de la réaction entre l'acide et l'eau est 14,8 % ;

-le pH de la solution est 3,43.

Le diagramme de distribution est donné ci-contre :



Donnée : $pK_A = -\log(K_A)$

II. Questions :

Pour ouvrir l'environnement Python, cliquer sur l'icône IDLE (Python), une première fenêtre s'ouvre (celle dans laquelle s'exécutera le programme). Cliquer sur File,Open... et ouvrir le fichier Python demandé. Une deuxième fenêtre s'ouvre, celle où figure le contenu modifiable du programme. Pour exécuter le programme, cliquer sur Run, Run module.

1-Taux d'avancement final d'une réaction entre un acide et l'eau

Soit AH un acide faible, du couple AH/A^-.

1-a) Ecrire l'équation de la réaction entre AH et l'eau.

1-b) On note h la concentration en ions oxonium à l'équilibre, $h=[H_3O^+]_{eq}$ et c_a la concentration apportée de la solution. Exprimer les concentrations à l'équilibre $[AH]_{eq}$, $[A^-]_{eq}$ puis la constante d'acidité K_A du couple AH/A^-, en fonction de h, c_a et $c_0=1\ mol.L^{-1}$.

1-c) Montrer que h est solution d'une équation de la forme $a h^2+b h+c=0$ pour laquelle on donnera les expressions de a, b et c en fonction de K_A, c_a et c_0.

1-d) Donner l'expression de sa solution positive.

1-e) Compléter le programme « tauxavancementfinal.py » fourni (document 1) et le vérifier sur l'exemple du document 3.

2-Diagramme de distribution

Le programme « diagrammedistribution.py » fourni réalise le diagramme de distribution d'un couple acide/base, c'est-à-dire la représentation de l'évolution des pourcentages des formes acide et basique dans la solution en fonction du pH.

2-a) Exécuter ce programme sur l'exemple du document 3 pour afficher le diagramme produit.

2-b) Le document 2 reprend un extrait du programme. Expliquer comment est construite la liste pH, et en particulier pourquoi on a choisi 120 itérations

2-c) En utilisant la définition de la constante d'acidité K_A du couple AH/A^-, montrer que $[A^-]_{eq}=[AH]_{eq}10^{pH-pKA}$.

2-d) Si l'on note P_b le pourcentage de l'espèce basique A^- et P_a le pourcentage de l'espèce acide AH, montrere que $P_b=P_a 10^{pH-pKA}$ et $P_a+P_b=100\,\%$.

2-e) Montrer, en résolvant ce système d'équations, que les lignes de calcul des listes P_b et P_a du programme calculent bien ces pourcentages.